

Title	拡散に支配されたクラスターの成長過程とフラクタル次元(秩序化過程における協力と乱れ-その動力的研究-(第2回),科研費研究会報告)
Author(s)	徳山, 道夫; 川崎, 恭治
Citation	物性研究 (1984), 43(2): 58-62
Issue Date	1984-11-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/91480
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

§ 1. はじめに

乱雑に枝分れしたクラスターが不可逆的に形成される様は、自然界のいたるところに見られる現象である。例えば、ススや煙粒子、^{1,2)} 樹枝状結晶、³⁾ 枝分れした高分子、^{4,5)} 乱流、⁶⁾ 絶縁破壊⁷⁾等の成長がそうである。これらの構造は一見乱雑で、何らマクロな規則性をもたないように見える。しかし、乱雑であればあるほど、質的に新たな規則性が見出されるであろうことは、統計物理学の立場から容易に期待される。

実際、これらの乱雑なパターンは、“自己相似性”という著しい特徴をもつことが知られている。クラスターを形成する小さな粒子の全個数を N 、その慣性半径を R とすると、この性質は、 $N \sim R^{D(d)}$ というスケールン規則によって部分的に表現できよう。ここに、 $D(d)$ はフラクタル次元(あるいは、Hausdorff次元)⁸⁾と呼ばれるものであり、 d は空間次元である。乱雑な形状を特徴づけるのに非整数次元 D が有用であることはよく知られているが、ここで更に重要なことは、 D がこれらの乱雑な形状をつくり出したプロセスを特徴づけることである。従って、乱雑な形状を支配する機構を理解する第一階として、まず D を理論的に求めることが重要であろう。

最近 Witten と Sander⁹⁾ は、ススや煙粒子の成長機構を理解するために、Diffusion-Limited Aggregation (DLA) モデルを提案し、計算機実験でそのフラクタル次元を決定し $D(2) \simeq 1.701$ を得た。その後 Meakin¹⁰⁾ は、このモデルを更に6次元まで拡張し、計算機実験において、 $D(d) \simeq 5d/6$ ($d=2 \sim 6$)であることを示した。ここではまず、このモデルを紹介し、次に、最近我々が提案した分子場理論¹¹⁾によって如何に一般的に $D(d)$ が見出されるかを概説しよう。

§ 2. DLAモデルと計算機実験

一般に d 次元の DLA モデルを議論しよう。 d 次元格子を考え、まず初期時刻にその中心に核となる粒子をおく。次に、それを中心とする大きな球を考え、その球上の任意の点から1つの粒子を解き放し、格子点をランダムウォークさせることにする。このとき、もし粒子が核の隣接格子点に到達したる粒子をそこで止め、クラスターの一部とする。それからまた新たな粒子を球上の任意の点から解き放し、クラスターの隣接点にくるまでランダムウォークさせ、クラスターの一部とする。このようにして、次々に新しい粒子を解き放し、同じ過程をくり返すことによって大きなクラスターを形成することにする。ただし、粒子がランダムウォークの途中で球の表面に到達したときは、その粒子は取除くことにして、その都度新しい粒子を解き放すことにする(図1参照)。

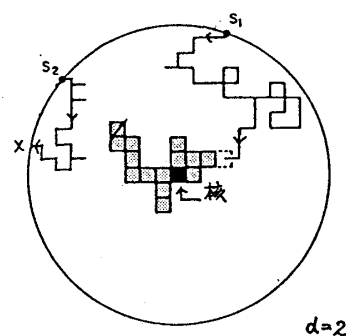


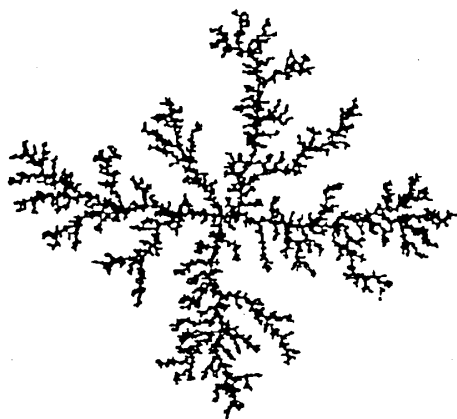
図1. DLAモデルによるクラスターの形成過程(文献10より)

Witten と Sander⁹⁾

は、計算機によって2次元DLAモデルをシミュレーションし、次の性質を明らかにした

(a) クラスターの外部先端が内部のそれよりもより早く成長すること。これは、粒子が拡散過程(あるいは、ブラウン運動)に支配されていることにより、クラスターの内部に到達する前に外部に捉えられてしまうことを意味している。このようにして、クラスターの外部は内部を遮蔽する役割を果たし、結果としてクラスターの形状は樹枝状になる。

図2は、2次元DLAモデルによって形成された典型的な例である。⁽¹⁰⁾



(b) フラクタル次元は、 $D(2) \simeq 1.70$ で与えられるが、この値は体系のミクロの性質、例えば格子の形(三角格子、正方格子)等に依らないこと。

図2. 2次元クラスター
 $N=11260$ (文献10より)

これらのマクロの性質は、高次元($d=2\sim 6$)においても成り立つことが、最近の Meakin⁽¹⁰⁾ による計算機実験によって確かめられた。ただし、 $D(d) \simeq 5d/6$ である。また彼は、無格子DLAモデルも発表し、そこでも同じ結果が得られることを示した。⁽¹⁰⁾

§3. 分子場理論

ここでは、高分子における Flory⁽¹²⁾ の分子場理論的観点から、如何に簡単にDLAモデルのフラクタル次元 $D(d)$ を理論的に見出しうるかをお話ししよう。クラスターの全粒子数が N 、そのときの慣性半径が R である確率分布を $P(N, R)$ として、次式で自由エネルギー関数 $F(N, R)$ を定義しよう。

$$P(N, R) \propto \exp[-F(N, R)]. \quad (1)$$

ここで、我々の着目する体系は非平衡系であり、 F は平衡系で言うところの自由エネルギーとは異なる点に注意すべきである。前節に紹介した、WittenとSanderおよびMeakinらの計算機実験の結果から、考えている体系には3つの特性の長さが存在することが分る。オ一は、粒子の半径 a で格子間隔程度である。オニは、遮蔽距離 $l \sim (\rho a^{d-2})^{-1/2}$ であり、 $\rho = N/R^d$ は粒子密度である。オ三は、慣性半径 R である。これらは、 $a \ll l \ll R$ なる関係をもつ。このとき、鎖状高分子の場合^(4,12)と同様に、体系の形状は2つの異なる機構によって支配されており、従って F は2つの項からなると考えられる：

$$F(N, R) = F_{\text{rep}}(N, R) + F_{\text{att}}(N, R). \quad (2)$$

オ一項は、遮蔽効果による反発項である。拡散粒子の流れは、クラスターの表面から長さ l 程度のところで遮蔽されると考えられる。従って、このことはクラスターを半径 a の粒子による鎖とみなすよりはむしろ、半径 l の球塊からなる仮想的鎖とみなした方が良いことを意味している。球塊の密度は l^{-d} で与えられるので、Flory理論⁽¹²⁾に従って、反発項 F_{rep} は次のようにかける。

$$F_{\text{rep}}(N, R) = \frac{a^d R^d}{\ell^{2d}} \quad (3)$$

オニ項は、半径 a の粒子からなるクラスターがランダムウォークによって形成されるとみなすことによる、引カ項である。この項の詳しい導出は文献11に譲るとして、引カ項 F_{att} は次のようにかける。

$$F_{\text{att}}(N, R) = \frac{R^{d+1}}{N a^{d+1}} \quad (4)$$

ただ、ここで注意してほしいのは、この項は高分子における *linear chain* の引カ項⁴⁾ とも *branched polymer* におけるそれ⁵⁾ とも異なる点である。実際、 $N \sim R^D$ を使って(4)式を書き直すと $F_{\text{att}} \sim R^2/N^{2\nu_0}$ 、 $\nu_0 = (D+1-d)/2D$ である。一方、*linear chain* では $\nu_0 = 1/2$ 、 $D = (d+2)/3$ 、また *branched polymer* では $\nu_0 = 1/4$ 、 $D = 2(d+2)/5$ であることが知られており、(4)式で表現されるランダムウォークはそのどちらにも属しないことが分る。反発項と引カ項との質的な違いは、名前からも分るように、前者はクラスターを大きくするような、また一方後者はそれをよりコンパクトにするような役割を演じる点にある。実際、(3)式、(4)式をそれぞれ1のオーダーにするようなフラクタル次元 D_0 と $N \sim R^{D_0}$ で定義するとき、前者では $D_0 = d-1$ 、後者では $D_0 = d+1$ である。これは、前者のプロセスのみでは、クラスターは1次元的に成長しようとし、空間的に広がることを意味している。また、後者のみの場合は、粒子はクラスター上に重なり、全体的によりコンパクトになることを示唆している。実際には、このように相反する機構が適度に競合しあって、図3のような樹枝状パターンが形成されるものと考えられる。確率分布 P を最大、すなわち、 F を最小にするように慣性半径 R を決めると、 N は次のようにスケールされる。

$$N \sim R^{D(d)} \quad (5)$$

$$D(d) = \frac{d^2+1}{d+1} \quad (6)$$

この分子場理論で求めたフラクタル次元(6)は、Meakin¹⁰⁾による計算機実験の結果 $D(d) \approx 5d/6$ とかなりよく合うことが分る。これは、我々が仮定した2つの異なるプロセスをもつモデルが正当であることを意味するのである。

ここでは、1個の核粒子からのクラスターの成長を議論したが、DLAモデルと同じ機構で、1次元(直線)基質上、2次元(平面)基質上等、一般に任意の次元の基質上に成長するクラスターのフラクタル次元も、同様の観点から容易に求めることができる。図3は、直線基質上にDLAと同じ機構で形成された典型的な樹枝状パターンである。¹³⁾ このような場合のフラクタル次元の導出の詳細は文献11に譲るとして、一般に $d-m$ 次元面上に成長するクラスターのフラクタル次元 $D_m(d)$ は次のように与えられる。

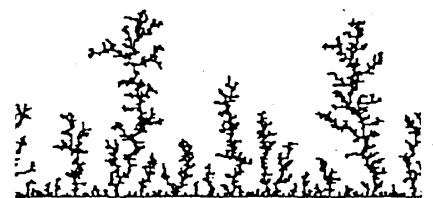


図3. 直線基質上に成長した2次元クラスター(文献13より)

$$D_m(d) = D(d) - (d-m) = m - (d-D(d)). \quad (7)$$

ここで、 $D(d)$ は(6)式で与えられ、 m は $1 \leq m \leq d$ をみたす整数である。 $D_d(d) = D(d)$ であり、点上成長はこの場合の1例と考えることもできる。今の場合、クラスターは m 次元空間のみで自由に成長できるが、 D_m は、そのときクラスターが m 次元空間をどの程度占有しているかを表わす尺度である。(6)式から分るように $D < d$ ($d > 1$) であるので、(7)式より $D_m < m$ である。(7)式の導出は、直観的には次のように理解できるであろう。点に成長する場合は0次元基質であり、そのフラクタル次元は $D=0$ で与えられるが、今の場合は $d-m$ 次元の与えられた面上に成長するので、その面の次元を D から差し引く必要がある。このようにして、(7)式が導かれる。このようなクラスター成長も Meakin¹³⁾によって計算機実験が行われているが、(7)式で与えられるフラクタル次元は彼の結果とよく一致している。

§4. おわりに

DLAモデルは、一般にランダムパターン形成の問題と関連して、最近増々活発に研究されるようになってきた。フラクタル次元 D を理論的に見出そうという試みは、2, 3行われているが、¹⁴⁾ いずれも満足ゆくものではない。ただ、Stanley グループ¹⁵⁾によるくり込み群論的アプローチは仲々面白いものであり、 $D(2) \simeq 1.67$ として計算機実験とよくあう結果をえている。

ここでは、乱雑なパターンができたとして、主にその静的側面に重きを置いてフラクタル次元を議論してきたが、実際はクラスターは不可逆的に成長してゆくものであり、その動的な性質を問題にすべきであろう。最近、Nauenberg グループ¹⁶⁾によって、そのような動的振舞が連続体モデルを使って議論されているが、それは分子場理論であり、 $D(d) = d-1$ という結果しか得ていない。この結果は、 $d \gg 1$ のときあるいは $Freez$ 項のみを考えたときの我々の結果と一致するが、これは揺ぎ(すなわち、ランダムウォーク過程)を無視した特別の場合にすぎない。それで、現在我々は揺ぎをも考慮した連続体モデルを検討中であり、近い将来ダイナミックな D を見出しうるであろうと期待している。

文献

- 1) S.K. Friedlander, *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior* (Wiley, New York, 1977).
- 2) S.R. Forrest and T.A. Witten, Jr., *J. Phys. A* **12** (1979) L109.
- 3) J.S. Langer and H. Müller-Krumbhaar, *Acta Met.* **26** (1978) 1681.
- 4) P.G. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics* (Cornell Univ. Press, Ithaca, New York, 1979).
- 5) M. Daoud and F.J. Joanny, *J. Phys. (Paris)* **42** (1981) 1359.
- 6) 森 肇, 統計力学の進歩(裳華房, 1981) P. 91.

- 7) Y. Sawada, S. Ohta, M. Yamazaki and H. Honjo, *Phys. Rev. A* 26 (1982) 3557.
- 8) B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, San Francisco, 1982).
- 9) T. A. Witten, Jr. and L. M. Sander, *Phys. Rev. Lett.* 47 (1981) 1400.
- 10) P. Meakin, *Phys. Rev. A* 27 (1983) 604, 1495.
- 11) M. Tokuyama and K. Kawasaki, *Phys. Lett. A* 100 (1984) 337.
K. Kawasaki and M. Tokuyama, *Proceedings of the 6th Kyoto Summer Institute on Chaos and Statistical Mechanics* (1983).
- 12) P. Flory, *Principles of Polymer Chemistry* (Cornell Univ. Press, Ithaca, New York, 1971) Chap. XII.
- 13) P. Meakin, *Phys. Rev. A* 27 (1983) 2616.
- 14) M. Muthukumar, *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 839.
H. G. E. Hentschel, *Phys. Rev. Lett.* 52 (1984) 212.
- 15) H. E. Stanley, F. Family and H. Gould, *J. Poly. Sci.* (1983).
- 16) M. Nauenberg, *Phys. Rev. B* 28 (1983) 449.
M. Nauenberg, R. Richter and L. M. Sander, *Phys. Rev. B* 28 (1983) 1649.